# 共役勾配法系の反復法で生じる誤差の評価

3E－2

櫻井 秀志, 野寺 隆
慶應義塾大学理工学部数理科学科

## 1 はじめに

線形方程式 $Ax=b$ の解を丸め誤差 $\epsilon$ のマシンを用い, 反復法で計算する時のその解の誤差について解析する. 一般的に述べると, 残差 $r$ が 0 に収束するアルゴリズムで計算された解の誤差は常にあるレベル以下に抑えられる (Greenbaum [1] を参照). ここでは, できるだけ一般的にそのレベルを求め, 共役勾配法系の反復法にあてはめて, その誤差を検証する.

## 2 反復法の有限精度実行

最初に, 丸め誤差 $\epsilon$ を持つマシンで次のようなモデルを仮定する.

$$fl(a\pm b)=a(1+\epsilon_1)\pm b(1+\epsilon_2),\quad |\epsilon_1|,|\epsilon_2|\le\epsilon \quad (1)$$

$$fl(a\ op\ b)=(a\ op\ b)(1+\epsilon_3),\ |\epsilon_3|\le\epsilon,\ op=*,/ \quad (2)$$

このとき, 演算則は次のようになる.

$$\|a\vec{v}-fl(a\vec{v})\|\le\epsilon\|a\vec{v}\| \quad (3)$$

$$\|\vec{v}+\vec{w}-fl(\vec{v}+\vec{w})\|\le\epsilon(\|\vec{v}\|+\|\vec{w}\|) \quad (4)$$

$$|\langle\vec{v},\vec{w}\rangle-fl(\langle\vec{v},\vec{w}\rangle)|\le n\epsilon\|\vec{v}\|\,\|\vec{w}\| \quad (5)$$

変数の表現方法については, $x_k,r_k,a_k,p_k$ は実際に計算を行なう変数とし, 行列の大きさ $n$, 反復数 $k$ あるいはその巾乗と, $\epsilon$ の二乗以上の巾乗との積から成る項を $O(\epsilon^2)$ と表すことにする. ただし, $O(\epsilon^2)$ が $\|A\|,\|x_k\|$ や $n,k$ 以外の変数を掛けている場合は, それらを省略せずに記述する.

これらの法則, 定義のもと, 反復法で計算される近似解の誤差について考える.

ここでは, 次の反復計算を行なう.

$$x_{k+1}=x_k+a_kp_k+\xi_k \quad (6)$$

$$r_{k+1}=r_k-a_kAp_k+\eta_k \quad (7)$$

演算則から,

$$\|\xi_k\|\le\epsilon\|x_k\|+(2\epsilon+\epsilon^2)\|a_kp_k\| \quad (8)$$

$$\|\eta_k\|\le\epsilon\|r_k\|+(2\epsilon+\epsilon^2)\|a_kAp_k\|+(1+\epsilon)^2\|a_kd_k\| \quad (9)$$

ただし, $fl(Ap_k)=Ap_k+d_k$ であり, $d_k$ は

$$\|d_k\|\le c\epsilon\|A\|\,\|p_k\| \quad (10)$$

ここで (6) と (7) から次式が導ける.

$$b-Ax_{k+1}-r_{k+1}=(b-Ax_0-r_0)-\sum_{j=0}^{k}(A\xi_j+\eta_j).$$

両辺のノルムをとり, $\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)$ で割ると,

$$\frac{\|b-Ax_{k+1}-r_{k+1}\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)}\le\frac{\|b-Ax_0-r_0\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)}+\sum_{j=0}^{k}\left(\frac{\|\xi_j\|}{\|x\|+\|x_0\|}+\frac{\|\eta_j\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)}\right) \quad (11)$$

(11) の右辺の最初の項について次式が示される.

$$\frac{\|b-Ax_0-r_0\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)}\le\epsilon(1+c)+O(\epsilon^2) \quad (12)$$

次の補題が (11) の右辺の残りの項について証明できる.

**補題 1**

$$\Theta=\max_{j\le k+1}\frac{\|x_j\|}{\|x\|+\|x_0\|}$$

と定義した時, 次式が成り立つ.

---

An Estimation of Errors for Conjugate-Gradient-Like Methods.
Hideshi SAKURAI, Takashi NODERA
Department of Mathematics, Faculty of Science and Technology, Keio University
3-14-1 Hiyoshi, Kohoku, Yokohama, 223, Japan

$$\sum_{j=0}^{k} \frac{\|\xi_j\|}{\|x\|+\|x_0\|} \leq (5(k+1)\epsilon + O(\epsilon^2))\Theta_{k+1}, \quad (13)$$

$$\sum_{j=0}^{k} \frac{\|\eta_j\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)}$$

$$\leq (\epsilon + O(\epsilon^2))(k+1)(1+(5+2c)\Theta_{k+1}) \quad (14)$$

さらに, (11) に (12),(13),(14) を代入することにより, 次の定理が得られる.

**定理 1** 実際の残差 $b - Ax_{k+1}$ とアルゴリズム上の残差 $r_{k+1}$ の誤差について次式が成り立つ.

$$\frac{\|b - Ax_{k+1} - r_{k+1}\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)}$$

$$\leq (\epsilon + O(\epsilon^2)) \times$$

$$(k+2+c+(k+1)(10+2c)\Theta_{k+1}) \quad (15)$$

最後に近似解 $x_k$ が安定するのに必要な反復数 $S$ を用いて (15) を書き直し, 結論とする.

$$\frac{\|b - Ax_{k+1} - r_{k+1}\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)}$$

$$\leq (\epsilon + O(\epsilon^2))(S+1+c+S(10+2c)\Theta) \quad (16)$$

ただし,

$$\Theta = \max_j \frac{\|x_j\|}{\|x\|+\|x_0\|}$$

## 3 共役勾配法

$\kappa \leq O(\epsilon^{-1})$ と仮定すると, 有限精度演算のもとで $\|r_{k+1}\|_{A^{-1}} \leq \gamma\|r_k\|_{A^{-1}}$ が成り立ち, $k \to \infty$ に対し, $r_{k+1}$ は 0 に収束する. ただし, $\gamma$ は $\gamma < 1$ を満たす定数とする. このことから, (16) は実際の残差 $b - Ax_{k+1}$ の境界を表している.

次に実際の残差 $b - Ax_{k+1}$ の 2 ノルムについて考える. 無限精度のもとでは,

$$\|x - x_{k+1}\| < \|x - x_0\|, \quad \frac{\|x_{k+1}\|}{\|x\|+\|x_0\|} < 2 \quad (17)$$

が示される. 有限精度演算のもとでも, $Ax = b$ ( 初期値を $x_0$ とする) の有限精度の計算を近似するような$\bar{A}\bar{x} = \bar{b}$ ( 初期値を $\bar{x}_0$ とする) の無限精度の計算が存在するので, (17) と同じことを示すことができる ([2] を参照). すなわち, 対応するそれぞれの近似解の誤差が近似的に等しいことが示され,

$$\|x - x_{k+1}\| \approx \|\bar{x} - \bar{x}_{k+1}\|$$

$$< \|\bar{x} - \bar{x}_0\| \approx \|x - x_0\|$$

となる.

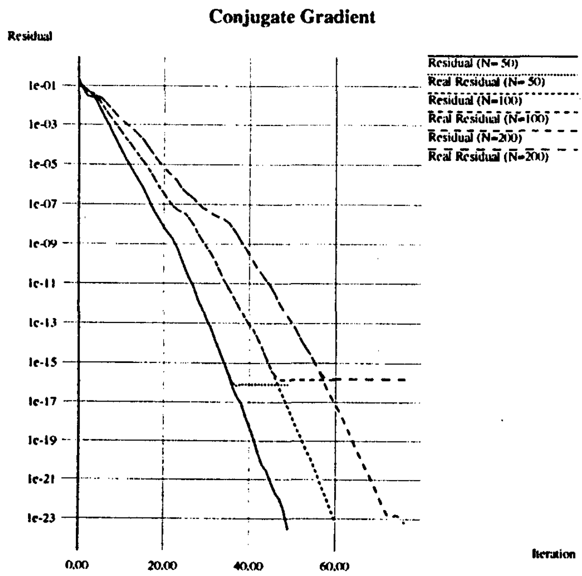
従って,

$$\Theta \leq 2,$$

$$\min_k \frac{\|b - Ax_{k+1}\|}{\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)} \leq O(\epsilon)S.$$

## 4 数値実験

共役勾配法を $\epsilon \approx 2.2\times10^{-16}$ の計算機で実行した例を次に示す. ただし, 使用した行列 $A$ はランダムに発生させた密度 0.20 以下の疎行列 (大きさ $N = 50, 100, 200$) で, 方程式の右辺 $b$ はランダムに発生させたベクトルである. グラフ中の "Residual" は $\|r_{k+1}\|/\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)$ を, "Real Residual" は $\|b - Ax_{k+1}\|/\|A\|(\|x\|+\|x_0\|)$ を表している. なお, 発表当日は他の共役勾配法系の反復法に関する詳細な実行例について報告する.




## 参考文献


[1] A. Greenbaum, *"Accuracy of Computed Solutions from Conjugate-Gradient -Like Methods"*, Advances in Numerial Methods for Large Sparse Sets of Linear Equations, 10 (1994), pp.126-138.

[2] A. Greenbaum, *"Behavior of Slightly Perturbed Lanczos and Conjugate Gradient Recurrences,"* Lin. Alg. Appl. 113 (1989), pp.7-63.